

## КИНЕТИКА РЕЛАКСАЦИИ НЕРАВНОВЕСНОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА

*И.В.Лепин*

*ИФТТМТ ННЦ ХФТИ, г.Харьков, Украина*

Виходячи з основного кінетичного рівняння, записаного для імовірності заповнення атомами водню міжвузлія у підрешітці металу у моделі решіткового газу, було отримане рівняння, що описує релаксацію нерівноважної концентрації впроваджених атомів водню. Отримане рівняння є модифікованим рівнянням дифузії. Відмінність від стандартного рівняння дифузії полягає в наявності нелінійних членів по надлишковій концентрації атомів водню. Через самоподобу процесу релаксації до однорідного рівноважного стану для аналізу отриманого рівняння застосований метод ренормалізаційної групи (РГ). Знайдено нерухомі точки рівняння і відповідні їм динамічні індекси у двовірному і тривірному випадках. Стійкій нерухомій точці відповідає динамічний індекс  $\Delta_\omega = 2$ , а характерні розміри неоднорідностей змінюються з часом за законом  $\bar{L}(t) \propto t^{\frac{1}{\Delta_\omega}} \propto t^{\frac{1}{2}}$ .

Исходя из основного кинетического уравнения, записанного для вероятности заполнения атомами водорода междоузлий в подрешетке металла в модели решеточного газа, было получено уравнение, описывающее релаксацию неравновесной концентрации внедренных атомов водорода. Полученное уравнение является модифицированным уравнением диффузии. Отличие от стандартного уравнения диффузии заключается в наличии нелинейных членов по избыточной концентрации атомов водорода. Ввиду самоподобия процесса релаксации к однородному равновесному состоянию для анализа полученного уравнения применен метод ренормализационной группы (РГ). Найден неподвижные точки уравнения и соответствующие им динамические индексы в двумерном и трехмерном случаях. Устойчивой неподвижной точке соответствует динамический индекс  $\Delta_\omega = 2$ , а характерные размеры неоднородностей изменяются со временем по закону  $\bar{L}(t) \propto t^{\frac{1}{\Delta_\omega}} \propto t^{\frac{1}{2}}$ .

Proceeding from basic kinetic of the equation which has been written down for probability of filling by atoms of hydrogen intercenters in sublattice of metal in model of lattice gas, the equation describing of relaxation of nonequilibrium concentration of introduced atoms of hydrogen was received. The received equation is the modified diffusion equation. The difference from the standard diffusion equation consists available of non-linear members on superfluous concentration of atoms of hydrogen. In view of self-similarity of relaxation process to a homogeneous equilibrium status for the analysis of the received equation the method of renormalization group (RG) is applied. The motionless points of the equation and dynamic indexes, appropriate to them, two-dimensional and three-dimensional cases are found. To a steady motionless point there corresponds (meets) a dynamic index=2, and the characteristic sizes of nongomogeneties change in due course under the law  $\bar{L}(t) \propto t^{\frac{1}{\Delta_\omega}} \propto t^{\frac{1}{2}}$ .

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Модель решеточного газа тесно связана с моделью Изинга [1], может описывать фазовый переход жидкость-пар, но самое непосредственное отношение имеет к сплавам внедрения, металлическая структура которых допускает возможность образования различного вида междоузлий (например, тетра- и октаэдрических), в которых при соответствующих условиях могут располагаться атомы легких элементов. Примерами таких систем могут служить нестехиометрические карбиды титана  $TiC_x$  [2], а также многочисленные металлические сплавы внедрения водорода  $ZrH_x$ ,  $PdH_x$ ,  $TiH_x$  и т.д. [3,4]. Эти материалы в настоящее время находят широкое применение в атомной энергетике [5], металлургии [6] и при создании материалов с новыми свойствами [7].

Обычно при создании таких систем металл помещают в среду водорода под определенным давлением; при этом в матрице металла создается неоднородное распределение концентрации водорода, которое со временем стремится к своему равновесному однородному состоянию. Так при насыщении палладия водородом вначале на поверхности металла образуется  $\beta$ -фаза, богатая водородом. Затем происходит диффузия водорода из поверхностного слоя в глубь металла и образуется  $\alpha$ -фаза, содержа-

щая меньшее количество водорода, чем  $\beta$ -фаза [3,4]. Исследование процессов релаксации неравновесных систем к однородному равновесному состоянию, а также процессов расслоения и упорядочения в металлических сплавах имеет большое значение. Интерес к этой проблеме определяется тем, что она связана как с фундаментальными аспектами неравновесной статистической физики, так и с важностью практического применения в материаловедении и металлургии, так как многие свойства сплавов (электропроводность, прочность, теплоемкость) зависят от степени неравновесности. Поэтому большое значение имеет изучение кинетики и выяснение законов релаксации к однородному равновесному состоянию.

В этой работе мы будем исследовать кинетику релаксации в сплавах внедрения при асимптотически больших временах на основе модели решеточного газа.

### 2. ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Будем рассматривать следующую модель решеточного газа. Представим  $d$ -мерное пространство, которое разбито на отдельные ячейки равного объема. В центре каждой ячейки может располагаться атом. Взаимодействие между атомами возможно

только в том случае, если они расположены в соседних ячейках. Потенциал взаимодействия запишем в виде:

$$U(\ell, \ell') = \begin{cases} \infty, & \ell' = \ell \\ U_0, & \ell' = \ell + a \\ 0, & \text{во всех других случаях,} \end{cases} \quad (1)$$

где  $\ell, \ell'$  – радиус-векторы ячеек,  $a$  – вектор трансляции.

В качестве исходного кинетического уравнения будем использовать уравнение баланса для вероятностей заполнения ячеек. Вероятность  $P_\ell$  заполнения атомом ячейки с радиус-вектором  $\ell$  как функция времени удовлетворяет уравнению непрерывности или основному кинетическому уравнению [8]:

$$\frac{\partial P_\ell}{\partial t} = \sum_{\ell'} W_{\ell'\ell} \cdot (1 - P_\ell) \cdot P_{\ell'} - \sum_{\ell'} W_{\ell\ell'} \times \\ \times (1 - P_{\ell'}) \cdot P_\ell + h_\ell(t), \quad (2)$$

где  $h_\ell(t)$  – случайная сила, характеризующая тепловые флуктуации в системе, а  $W_{\ell\ell'}$  – вероятность перехода атома в единицу времени из ячейки  $\ell'$  в ячейку  $\ell$ . Смысл уравнения (2) прозрачен – первый член в правой части описывает приход атома из ячейки  $\ell'$  в ячейку  $\ell$  при условии, что она свободна; второй – уход. Будем считать, что  $W_{\ell\ell'}$  отлична от нуля только для переходов между ближайшими соседями. Эта величина зависит от характера окружения ячеек  $\ell$  и  $\ell'$  атомами, поэтому вероятность перехода зависит от конфигурации системы. Будем использовать простейшее предположение о структуре  $W_{\ell\ell'}$ ; она является функцией заполнения только ближайших  $k$  и  $\ell'$  ячеек решетки:

$$W_{\ell\ell'} = W(\varepsilon \sum_a (P_{\ell'+a} - P_{\ell-a})) \quad (3)$$

В (3) суммирование производится по ближайшим ячейкам;  $a$  – радиус-вектор ближайших соседей. Величина  $\varepsilon$  зависит от потенциала взаимодействия  $U_0$  и имеет вид  $\varepsilon = U_0/T$ , где  $T$  – температура.

При малом значении потенциала взаимодействия или больших температурах, когда выполняется условие  $\varepsilon \ll 1$ , вероятность перехода  $W_{\ell\ell'}$  может быть разложена в ряд Тейлора по степеням  $\varepsilon$ :

$$W_{\ell\ell'} = W_0 + \varepsilon \cdot W_1 \sum_a (P_{\ell'+a} - P_{\ell-a}) + \frac{1}{2} W_2 \times \\ \times \varepsilon^2 \left[ \sum_a (P_{\ell'+a} - P_{\ell-a}) \right]^2 + \dots \quad (4)$$

Если система находится вблизи равновесия, то вероятность заполнения узла  $P_\ell$  может быть представлена в виде:

$$P_\ell = c \cdot (1 + m_\ell), \quad (5)$$

где  $c$  – концентрация, а  $m_\ell$  – малая по величине и медленно меняющаяся функция координаты  $\ell$  и времени  $t$ ,  $m_\ell$  – это локальная избыточная или недостаточная концентрация по сравнению со средней  $c$ .

В (4) ограничимся первыми двумя членами и разложим в ряд величины  $P_{\ell-a}$  и  $P_{\ell+a}$ :

$$P_{\ell+a} = P_\ell + \sum_a \frac{\partial P_\ell}{\partial \ell_a} \cdot a_\alpha + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 P_\ell}{\partial \ell_\alpha \partial \ell_\beta} \cdot a_\alpha \cdot a_\beta +$$

$$+ \frac{1}{2!} \sum_a \frac{\partial^2 P_\ell}{\partial \ell_\alpha^2} \cdot a_\alpha^2 + \dots \quad (6)$$

Использование конечного числа членов ряда оправдано, так как в соответствии с (5)

$$P_\ell > \frac{\partial P_\ell}{\partial \ell_\alpha} > \frac{\partial^2 P_\ell}{\partial \ell_\alpha^2} > \dots$$

Подставляя (4), (5) и (6) в основное кинетическое уравнение (2), можно прийти, проведя несложные вычисления, к следующему уравнению для величины  $m$ :

$$\frac{\partial m}{\partial t} = D_0 \Delta m + b_0 \Delta m^2 + g_0 \Delta m^3 + h(r, t), \quad (7)$$

где:

$$D_0 = \beta W_0 V_0 + \alpha c \cdot (1 - c) \\ b_0 = \frac{1}{2} \alpha c \cdot (1 - 2c) \\ g_0 = -\frac{1}{3} \alpha c^2 \\ \alpha = 2\beta Z \varepsilon W_1 V_0 \\ \beta = \frac{1}{2} \sum_a a_\alpha^2. \quad (8)$$

В (8)  $V_0$  – это объем системы,  $Z$  – координационное число – количество ближайших соседей.

Уравнение (7) представляет собой несколько модифицированное уравнение диффузии.

### 3. РЕНОРМГРУППОВОЙ АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Многие физические процессы протекают самоподобным, автомодельным образом. Это прежде всего относится к поведению систем, в которых возможен фазовый переход в критической точке [9]. Пусть некоторый физический процесс характеризуется величиной  $c(x, t)$  как функцией координат и времени. Тогда он является самоподобным или масштабно-инвариантным, если существует следующее масштабное преобразование [10]:

$$c(x \lambda^{A_x}; t \lambda^{A_t}) = \lambda^{A_c} \cdot c(x, t), \quad (9)$$

где  $\lambda$  – масштабный множитель, а  $A_x, A_t$  и

$A_c$  – соответствующие масштабные размерности. Решение этого функционального уравнения есть [11]:

$$c(x, t) = t^{A_c/A_t} \cdot F\left(\frac{x}{t^{A_x/A_t}}\right), \quad (10)$$

где  $F$  – некоторая функция, зависящая только от отношения  $\frac{x}{t^{A_x/A_t}}$ .

Например, процесс диффузии является самоподобным, так как его решение

$c(x, t) = \left(\frac{1}{4\pi Dt}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$  удовлетворяет (10) с масштабными размерностями  $A_c = -3$ ,  $A_t = 2$ , и  $A_x = 1$ .

Мы будем предполагать, что уравнение (7), полученное в предыдущем разделе, описывает самоподобный динамический процесс. Поэтому для его анализа можно применить метод ренормализационной группы (РГ) [12, 13].

В уравнении (7) перейдем к Фурье-представлению полей избыточной концентрации и случайной силы:

$$m(x, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^d} m(\bar{k}, \omega) \cdot e^{i\bar{k}\bar{x} - i\omega t} \quad (11)$$

$$h(x, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^d} h(\bar{k}, \omega) \cdot e^{i\bar{k}\bar{x} - i\omega t}.$$

В (11) интегрирование по частоте производится в интервале  $]-\infty; +\infty[$ , по волновым векторам по зоне Бриллюэна, заменяемой единичной сферой радиуса  $k_0 \sim 2\pi/a$ .

Уравнение (7) в Фурье-представлении имеет вид (в дальнейшем будем писать для краткости знак  $\Sigma$  вместо знака  $\int$ ):

$$m(k, \omega) = G^0(k, \omega) \cdot h(k, \omega) - b_0 k^2 G^0(k, \omega) \times$$

$$\times \sum_{k_1, \omega_1} m(k_1, \omega_1) \cdot m(k - k_1, \omega - \omega_1) -$$

$$- g_0 k^2 G^0(k, \omega) \cdot \sum_{k_1, k_2, \omega_1, \omega_2} m(k_1, \omega_1) \cdot m(k_2, \omega_2) \times$$

$$\times m(k - k_1 - k_2, \omega - \omega_1 - \omega_2), \quad (12)$$

где функция линейного отклика  $G^0(k, \omega) = [-i\omega + D_0 k^2]^{-1}$ , а среднее значение и коррелятор случайной силы определены следующим образом [9]:

$$\langle h(k, \omega) \rangle = 0$$

$$\langle h(k_1, \omega_1) \cdot h(k_2, \omega_2) \rangle = 2k_B T \cdot \delta_{k_1 + k_2, 0} \cdot \delta_{\omega_1 + \omega_2, 0}. \quad (13)$$

Согласно РГ-методу весь интервал волновых векторов разделим на две части:

$0 \leq k \leq k\lambda$  или  $\lambda k_0 < k \leq k_0$ , где  $k_0$  – абсолютное значение вектора обратной решетки,  $\lambda$  – параметр обрезания ( $\lambda < 1$ , но  $1 - \lambda \ll 1$ ). В соответствии с таким разбиением волновых векторов Фурье-компоненты поля избыточной концентрации представимы в виде:

$$m(k, \omega) = \begin{cases} m^<(k, \omega), & 0 \leq k \leq \lambda k_0 \\ m^>(k, \omega), & \lambda k_0 < k \leq k_0. \end{cases} \quad (14)$$

Подставляя (14) в уравнение (12), получим два уравнения для длинно- и коротковолновых гармоник  $m(k, \omega)$ :

$$m^< = G^0 \cdot h - b_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^< \cdot m^< - g_0 k^2 G^0 \times$$

$$\times \Sigma m^< \cdot m^< \cdot m^< - b_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^> \cdot m^> - g_0 k^2 G^0 -$$

$$- 3g_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^> \cdot m^< \cdot m^>, \quad (15)$$

$$m^> = G^0 \cdot h - b_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^> \cdot m^> - g_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^> \cdot m^> \cdot m^> -$$

$$- b_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^< \cdot m^> - 2b_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^< \cdot m^> -$$

$$- 3g_0 k^2 G^0 \cdot \Sigma m^< \cdot m^< \cdot m^>. \quad (16)$$

Аргументы в уравнениях (15) и (16) соответствуют аргументам в уравнении (12).

Подставляя уравнение (16) в (15) и заменяя в (16) произведения  $m^> \cdot m^>$  корреляционной функцией в нулевом приближении  $C^0 = \langle m^>(k, \omega) \cdot m^>(k', \omega') \rangle$ , исключим из кинетического уравнения (15) амплитуды коротковолновых гармоник избыточной концентрации  $m^>(k, \omega)$ . Далее воспользуемся флуктуационно-диссипативной теоремой ФДТ [11], связывающей корреляционную функцию с мнимой частью функции линейного отклика

$C^0(k, \omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \text{Im} G^0(k, \omega)$  и являющейся следствием коррелятора (13). После этой процедуры из уравнения (15) получается уравнение, имеющее ту же структуру, что и исходное кинетическое уравнение (12), но с перенормированной функцией линейного отклика и коэффициентами  $b$  и  $g$ :

$$m(k, \omega) = \tilde{G}^0(k, \omega) \cdot h(k, \omega) - b_1 k^2 \tilde{G}^0(k, \omega) \times$$

$$\times \sum' m(k_1, \omega_1) \cdot m(k - k_1, \omega - \omega_1) -$$

$$- g_1 k^2 \tilde{G}^0(k, \omega) \cdot \sum' m(k_1, \omega_1) \cdot m(k_2, \omega_2) \times$$

$$\times m(k - k_1 - k_2, \omega - \omega_1 - \omega_2), \quad (17)$$

где:

$$\tilde{G}^0(k, \omega) = [-i\omega + D_1 k^2]^{-1}$$

$$D_1 = D_0 - 6b_0^2 \Phi_4 + 4g_0 \Phi_3$$

$$b_1 = b_0 \cdot [1 + 4b_0^2 \Phi_2 - 18g_0 \Phi_4]$$

$$g_1 = g_0 \cdot [1 + 24b_0^2 \Phi_2 - 18g_0 \Phi_4]. \quad (18)$$

$$\Phi_2 = 2k_B T \cdot \sum_{k_1, \omega_1} k_1^4 |G^0(k_1, \omega_1)|^4$$

$$\Phi_3 = 2k_B T \cdot \sum_{k_1, \omega_1} |G^0(k_1, \omega_1)|^2 \quad (19)$$

$$\Phi_4 = 2k_B T \cdot \sum_{k_1, \omega_1} k_1^2 G^0(k_1, \omega_1) |G^0(k_1, \omega_1)|^2.$$

Знак  $\sum'$  в уравнении (17) означает суммирование (интегрирование) по волновым векторам в интервале  $[0; \lambda k_0]$ . Суммирование (интегрирование) в (19) необходимо выполнить по  $\omega_1$  в интервале  $]-\infty; +\infty[$ , а по  $k_1$  в интервале  $[\lambda k_0; k_0]$ . Суммы (19) вычисляются элементарно и равны:

$$\Phi_3 = \frac{1}{D_0} \cdot \Psi(1 - \lambda); \quad \Phi_4 = \frac{1}{2D_0^2} \cdot \Psi(1 - \lambda);$$

$$\Phi_2 = \frac{1}{2D_0^3} \cdot \Psi(1 - \lambda),$$

где  $\Psi = \frac{k_B T}{(2\pi)^d} \cdot O_d \cdot k_0^{d-2}$ ; площадь поверхности еди-

ничной  $d$ -мерной сферы  $O_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ ;  $\Gamma$  – гамма

функция. На этом заканчивается первый этап преобразований ренормгруппы.

Далее следуя РГ-методу, произведем масштабное преобразование волновых векторов  $k' = k \cdot \lambda^{-1}$ , при этом масштабное преобразование частоты  $\omega' = \omega \cdot \lambda^{-d_\omega}$ . Масштабное преобразование полей определим следующим образом:

$$m(k, \omega) = m(k' \cdot \lambda; \omega' \cdot \lambda^{d_\omega}) = Z_1(\lambda) \cdot m(k', \omega'). \quad (20)$$

$$h(k, \omega) = h(k' \cdot \lambda; \omega' \cdot \lambda^{d_\omega}) = Z_2(\lambda) \cdot h(k', \omega'). \quad (21)$$

Масштабный множитель  $Z_2(\lambda)$  определим из следующих соображений:

$$\langle h(k, \omega) \cdot h(k_1, \omega_1) \rangle =$$

$$\langle h(k' \cdot \lambda; \omega' \cdot \lambda^{d_\omega}) \cdot h(k'_1 \cdot \lambda; \omega'_1 \cdot \lambda^{d_\omega}) \rangle =$$

$$= Z_2^2(\lambda) \langle h(k', \omega') \cdot h(k'_1, \omega'_1) \rangle. \quad (22)$$

С другой стороны, согласно определению коррелятора (13) имеем:

$$\begin{aligned} \langle h(k, \omega) \cdot h(k_1, \omega_1) \rangle &= 2k_B T \cdot \delta(k + k_1) \cdot \delta(\omega + \omega_1) = \\ &= 2k_B T \cdot \delta(\lambda(k + k_1)) \cdot \delta(\lambda^{\Delta_\omega}(\omega + \omega_1)) = \\ &= 2k_B T \lambda^{-d} \cdot \lambda^{-\Delta_\omega} \cdot \delta(k + k_1) \cdot \delta(\omega + \omega_1) = \\ &= \lambda^{-d} \cdot \lambda^{-\Delta_\omega} \cdot \langle h(k', \omega') \cdot h(k'_1, \omega'_1) \rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

При выводе (23) было использовано свойство  $\delta$ -функции  $\delta(\alpha x) = 1/|\alpha| \cdot \delta(x)$ . Из сравнения (22) и (23) имеем:

$$Z_2(\lambda) = \lambda^{-\frac{d+\Delta_\omega}{2}}. \quad (24)$$

После масштабного преобразования кинетическое уравнение (12) приводится к виду:

$$\begin{aligned} Z_1(\lambda) \cdot m(k', \omega') &= Z_2(\lambda) \cdot G_1(k', \omega') \cdot h(k', \omega') - \\ & b_1 \cdot k'^2 \cdot G_1(k', \omega') \cdot \lambda^2 \cdot \lambda^{d+\Delta_\omega} \cdot Z_1(\lambda) \times \\ & \times \sum m(k'_1, \omega'_1) \cdot m(k' - k'_1, \omega' - \omega'_1) - \\ & g_1 k'^2 \cdot G_1(k', \omega') \cdot \lambda^2 \cdot \lambda^{2d+2\Delta_\omega} \cdot Z_1^3(\lambda) \times \\ & \times \sum m(k'_1, \omega'_1) \cdot m(k'_2, \omega'_2) \cdot m(k' - k'_1 - k'_2, \omega' - \omega'_1 - \omega'_2), \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} G_1(k', \omega') &= \left[ -i\omega' \cdot \lambda^{\Delta_\omega} + \lambda^2 \cdot k'^2 \cdot D_1 \right]^{-1} = \\ &= \lambda^{-\Delta_\omega} \left[ -i\omega' + \lambda^{2-\Delta_\omega} \cdot k'^2 \cdot D_1 \right]^{-1}. \end{aligned}$$

В уравнении (25) каждое суммирование по волновому вектору дает множитель  $\lambda^d$ , а по частоте  $\lambda^{\Delta_\omega}$ .

Для того, чтобы уравнение (25) обладало точно такой же структурой, что и исходное уравнение (12), то есть было инвариантным относительно двух этапов РГ-преобразований, необходимо выполнение условия  $\frac{Z_2(\lambda)}{Z_1(\lambda)} \cdot \lambda^{-\Delta_\omega} = 1$ , которое определяет масштабное преобразование поля  $m(k, \omega)$ :

$$Z_1(\lambda) = \lambda^{-\frac{d+3\Delta_\omega}{2}}. \quad (26)$$

При этом коэффициенты  $b$  и  $g$ , входящие в уравнение, и коэффициент  $D$ , определяющий функцию отклика, преобразуются следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_1 &= \lambda^{2-\Delta_\omega} \cdot D_1 = \lambda^{2-\Delta_\omega} \cdot D_0 \left[ 1 - \frac{6b_0^2}{D_0} \Phi_4 + \frac{4g_0}{D_0} \Phi_3 \right] \\ \tilde{b}_1 &= \lambda^{2+d} \cdot \lambda^{-\frac{d+3\Delta_\omega}{2}} \cdot b_1 = \lambda^{2+\frac{d-3\Delta_\omega}{2}} \times \\ & \times b_0 \left[ 1 + 4b_0^2 \Phi_2 - 18g_0 \Phi_4 \right] \\ \tilde{g}_1 &= \lambda^{2+2d+\Delta_\omega} \cdot \lambda^{-d-3\Delta_\omega} \cdot g_1 = \lambda^{2+d-2\Delta_\omega} \times \\ & \times g_0 \left[ 1 + 24b_0^2 \Phi_2 - 18g_0 \Phi_4 \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

Множественно повторяя процедуру РГ-преобразований, а также с учетом вычисленных сумм  $\Phi_2, \Phi_3, \Phi_4$ , приходим к следующим рекуррентным соотношениям для коэффициентов:

$$\begin{aligned} D_{n+1} &= \lambda^{2-\Delta_\omega} \cdot D_n \left[ 1 - \frac{3b_n^2}{D_n^3} \Psi(1-\lambda) + \frac{4g_n}{D_n^2} \Psi(1-\lambda) \right] \\ b_{n+1} &= \lambda^{2+\frac{d-3\Delta_\omega}{2}} \cdot b_n \left[ 1 + \frac{2b_n^2}{D_n^3} \Psi(1-\lambda) - \frac{9g_n}{D_n^2} \Psi(1-\lambda) \right] \\ g_{n+1} &= \lambda^{2+d-2\Delta_\omega} \cdot g_n \left[ 1 + \frac{12b_n^2}{D_n^3} \Psi(1-\lambda) - \frac{9g_n}{D_n^2} \Psi(1-\lambda) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

Система (28) должна исследоваться на неподвижные точки для коэффициентов, их устойчивость; при этом каждой неподвижной точке соответствует свой динамический индекс  $\Delta\omega$ , определяющий кинетику системы.

#### 4. НЕПОДВИЖНЫЕ ТОЧКИ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ

Рассмотрим случай  $\lim_{n \rightarrow \infty} D_n = D^* = \text{const}$ . Обращая внимание на то, что в системе (28) коэффициенты входят в комбинациях  $\frac{b_n^2}{D_n^3}$  и  $\frac{g_n}{D_n^2}$ , перейдем к новым переменным  $x_n = \frac{b_n^2 \Psi}{D_n^3}$  и  $y_n = \frac{g_n \Psi}{D_n^2}$ . Тогда из системы (28) получаем:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n \cdot \lambda^{d-2} \cdot \left[ 1 + 13x_n(1-\lambda) - 30y_n(1-\lambda) \right] \\ y_{n+1} &= y_n \cdot \lambda^{d-2} \cdot \left[ 1 + 18x_n(1-\lambda) - 17y_n(1-\lambda) \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

При этом первое уравнение системы (28) дает следующее значение для динамического индекса:

$$\Delta_\omega = 2 + 3x - 4y. \quad (30)$$

В системе (29) от дискретных переменных удобно перейти к непрерывным переменным в пределе  $(1-\lambda) \rightarrow 0$ , что облегчит нахождение неподвижных точек и определение их устойчивости:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= x \cdot [2 - d + 13x - 30y] \\ \dot{y} &= y \cdot [2 - d + 18x - 17y]. \end{aligned} \quad (31)$$

Точка над переменными обозначает дифференцирование по  $(1-\lambda)$ . Прежде всего нас интересуют неподвижные точки или точки равновесия системы (31) и соответствующие им динамические индексы. Существует тривиальная неподвижная точка  $A: \overset{\circ}{x} = \overset{\circ}{y} = 0$ , ей соответствует динамический индекс  $\Delta_\omega = 2$ , а также две нетривиальные точки  $B: \overset{\circ}{x} = 0; \overset{\circ}{y} = \frac{2-d}{17}; \Delta_\omega = 2 + \frac{4}{17}(d-2)$  и  $C: \overset{\circ}{x} = \frac{d-2}{13}; \overset{\circ}{y} = 0; \Delta_\omega = 2 + \frac{3}{13}(d-2)$ .

Размерность пространства  $d = 2$  (квази-двумерный случай) является для системы (31) особой размерностью: при  $d=2$  существует единственная тривиальная точка  $A$ , при  $d>2$  происходит бифуркация и от тривиальной точки  $A$  отщепляются две нетривиальные точки  $B$  и  $C$ .

Исследование устойчивости неподвижных точек  $A, B$  и  $C$  проведем стандартным образом [14]. Систе-

ма (31) представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений в двумерном фазовом пространстве. Ее можно записать в компактном виде:  $\dot{X} = \Omega(X)$ , где  $X \equiv (x, y)$  – вектор в пространстве двух величин, а  $\Omega(X)$  – векторное поле с компонентами, равными правым частям системы (31).

Матрица Якоби векторного поля  $\vec{A} = \frac{\partial \Omega}{\partial X}$  для системы (31) имеет вид:

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 2-d+26x-30y & -30x \\ 18y & 2-d+18x-34y \end{pmatrix} \quad (32)$$

Пусть  $\Delta X$  – малое отклонение от  $i$ -той неподвижной точки, тогда изменение  $\Delta X$  можно определить из уравнения:

$$\Delta X = \hat{A}_i \Delta X, \quad (33)$$

где в уравнении (33) матрица  $\hat{A}_i$  – это уже не функциональная, а числовая матрица, полученная из (32) подстановкой в нее численного значения  $i$ -той неподвижной точки  $\vec{X} = (x^i; y^i)$ .

Собственные значения матрицы  $\hat{A}_i$  и будут определять устойчивость неподвижной точки. Спектр собственных значений квадратной матрицы порядка  $n$  совпадает с множеством корней алгебраического уравнения  $n$ -степени:

$$\det(\hat{A}_i - \lambda \hat{I}) = 0, \quad (34)$$

где  $\hat{I}$  – единичная матрица.

В двумерном случае уравнение (34) имеет вид:

$$\lambda^2 - \lambda \cdot \text{Sp} \hat{A}_i + \det \hat{A}_i = 0. \quad (35)$$

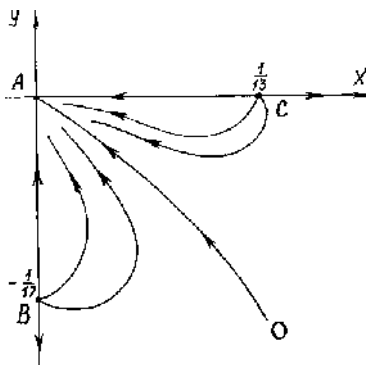
Вычисленные собственные значения  $\lambda_k (k=1,2)$  для неподвижных точек следующие:

$$A(\lambda_1 = \lambda_2 = 2-d); \quad B(\lambda_1 = \frac{13}{17}(d-2);$$

$$\lambda_2 = d-2) \text{ и } C(\lambda_1 = d-2; \lambda_2 = \frac{5}{13}(d-2)).$$

Видно, что для размерности пространства  $d > 2$  собственные значения для точки  $A$  – вещественные отрицательные числа, следовательно, точка  $A$  – устойчивый узел. Аналогично точки  $B$  и  $C$  – устойчивые узлы.

Качественный портрет для неподвижных точек и фазовых траекторий в трехмерном случае ( $d=3$ ) изображен на рисунке.



### Качественный фазовый портрет для системы (31) в трехмерном случае

Здесь  $OA$  – сепаратриса, разделяющая два режима движения на фазовой плоскости.

Таким образом, существует единственная устойчивая неподвижная точка  $A(\dot{x} = \dot{y} = 0)$ , которой соответствует динамический индекс  $\Delta_\omega = 2$  (при этом уравнение (7) вырождается в тривиальное уравнение диффузии). Фурье-компонента поля избыточной концентрации  $m(k, \omega)$  согласно (20) и (10) с учетом (26) имеет вид:

$$m(k, \omega) = k^{-\frac{d+6}{2}} \cdot F\left(\frac{\omega}{k^2}\right), \quad (36)$$

а средний размер неоднородностей изменяется со временем по закону  $\bar{L} \propto t^{1/2}$ .

Формально существует еще одна нетривиальная возможность. Из (8) следует, что при средней концентрации  $c = 0,5$  коэффициент  $b_0$  в уравнении (7), а следовательно, и  $x$  в системе (31) изначально равны нулю. Тогда существует такое отношение потенциала взаимодействия и температуры  $\varepsilon = \frac{U_0}{T}$ , при кото-

ром:  $y = \frac{g_0 \Psi}{D^2} = -\frac{1}{3} \frac{\alpha c^2}{D^2} \Psi = \dot{y} = \frac{2-d}{17}$ , и система с самого начала оказывается в неподвижной точке  $B$ , которая характеризуется нетривиальной динамикой с  $\Delta_\omega = 2 + \frac{4}{17} = 2,236$ , при этом  $\bar{L} \propto t^{\frac{1}{2,236}}$  ( $d=3$ ). Однако физически очевидно, что концентрация  $c = 0,5$  ничем не выделена, и учет в уравнении (7) членов более высокого порядка  $\propto \Delta m^4, \Delta m^5$  и т. д. выведет систему из неподвижной точки  $B$ .

По своему смыслу метод ренормгруппы позволяет исследовать поведение системы только при асимптотически больших временах. На начальных и промежуточных временах релаксации нелинейные члены в уравнении (7)  $\Delta m^2$  и  $\Delta m^3$  могут быть весьма существенны и определять другие законы релаксации, для нахождения которых необходимо либо искать точное решение уравнения (7), либо использовать другие приближенные методы его решения.

Подход, развитый в этой работе, может быть полезен для анализа кинетики внедренных атомов металла в металлической подрешетке при достаточно высоких температурах, когда легкий элемент образует однофазную область выше кривой сосуществования фаз. В системах  $NbH_x, PdH_x$  при закалке (резком понижении температуры) происходит расслоение типа спиноподобного распада на области, обогащенные и обедненные водородом [3]. Данный подход, основанный на разложении (4) по малому параметру  $\varepsilon = \frac{U_0}{T}$  не позволяет исследовать кинетику таких процессов, характерных для более низких температур и описываемых законами кинетики зародышеобразования Лифшица-Слезова  $\bar{L} \propto t^{1/3}$  [15] или спиноподобного распада  $\bar{L} \propto t^{1/4}$  [16].

## ЛИТЕРАТУРА

1. T.D.Lee, C.N.Yang // *Phys. Rev.*, 1952, 87, с.410.
2. И.С. Латергаус. *Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук.* Ташкент, 1986.
3. *Водород в металлах.* /Под. ред. Г.Алефельда и И.Фелькля. М.: «Мир», 1981, т.1.
4. Н.А. Галактионова. *Водород в металлах.* М.: «Металлургия», 1967.
5. А.С.Займовский, А.В.Никулина, Н.Г.Решетников. *Циркониевые сплавы в атомной энергетике.* М.: «Энергоиздат», 1981.
6. В.К.Носов, Б.А.Колачев. *Водородное пластифицирование при горячей деформации титановых сплавов.* М.: «Металлургия», 1986.
7. Б.А.Колачев // *Металловедение и термическая обработка металлов.* 1999, №3, с.3.
8. А.Исихара. *Статистическая физика.* М.: «Мир», 1973.
9. Ш.Ма. *Современная теория критических явлений.* М.: «Мир», 1980.
10. Г.И.Барренблатт. *Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика.* М.: «Гидрометеиздат», 1982.
11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. *Статистическая физика.* М.: «Наука», 1976.
12. И.В.Лепин, В.С.Пресман, А.Ш.Махмудов // *ФММ.* 1990, № 10, 31.
13. И.В.Лепин // *Технология приборостроения.* 1999, №1, с.47.
14. А.Лихтенберг, М.Либерман. *Регулярная и стохастическая механика.* М.: «Мир», 1984.
15. И.М.Лифшиц, В.В.Слезов // *ЖЭТФ.* 1958, т.35, №2, с.479.
16. К.Биндер. *Кинетика расслоения фаз.* /В кн.: *Синергетика.* М.: «Мир», 1984.